格子上の Hamiltonian cycle の 場の理論を用いた数え上げ

東京大学大学院 総合文化研究科 樋口 三郎*

問題

格子 G の辺をたどって, すべての頂点をちょうど 1 回ずつ訪れる経路を Hamiltonian walk といい, 閉じた Hamiltonian walk を Hamiltonian cycle という. Hamiltonian cycle の個数を $\mathcal{H}(G)$ とかく. この量 $\mathcal{H}(G)$ は, 高分子の結晶のエントロピーと関係づけられる. これを見積もることは, 高分子の結晶化 [1], たんぱく質の高次構造 [2] などを考える上で役に立つ. Hamiltonian walk は特別な self-avoiding walk であり, また, 統計力学的系として $O(n)$ loop 模型, fully packed loop 模型の特殊な場合である [3].

一様な格子の場合, 次に述べる場の理論による表示に平均場鞍点近似を施すと, 格子の頂点の数 $N := \#G$ が $N \to \infty$ となる極限で,

$$\mathcal{H}(G) \sim \omega^N, \qquad \omega := q/e \tag{1}$$

が予言される [4, 5]. ここで q は coordination 数 (一つの頂点から出る辺の個数) である. これは, 多くの例について非常に良い近似になっていることが知られている.

ここでは, (1) の摂動の高次への精密化 [5], 適用範囲の拡張 [6] を行なった. いくつかの格子についてこれらを適用して $\mathcal{H}(G)$ を評価したところ, 数値計算とよく一致することがわかった.

場の理論による Hamiltonian cycle の個数 $\mathcal{H}(G)$ の表示

任意のグラフ G について, 量 $\mathcal{H}(G)$ を, G の上の場の理論の $2N$-点関数として表示する. O(n) ベクター場 $\vec{\phi}(r) = (\phi_j(r))$ $(r \in G, j = 1, \dots, n)$ を導入する. グラフの隣接行列を $\Delta_{rr'}$ $(r, r' \in G)$ として, 作用

$$S[\phi_j(r)] = \tfrac{1}{2}\textstyle\sum_{r,r'\in G, j=1,\dots,n} \phi_j(r)\sqrt{-1}(\Delta^{-1})_{rr'}\phi_j(r') \tag{2}$$

で決まる重み e^{-S} で期待値 $\langle\cdot\rangle$ を定義する. このとき 量 $\mathcal{H}(G)$ は次のようにかける.

$$\mathcal{H}(G) = \lim_{n\to 0}\frac{1}{n}\left|\left\langle \textstyle\prod_{r\in G} \tfrac{1}{2}\vec{\phi}\cdot\vec{\phi}(r)\right\rangle\right|. \tag{3}$$

表示 (3) に平均場鞍点近似を施すことにより, 評価(1) を得る.

格子の大域的構造への依存性

鞍点法による評価 (1) は, (q, N) という bulk の性質だけに着目した評価式である. 表示 (3) において, 鞍点のまわりのゆらぎの gauss 積分を行なうことにより, より詳細な依存性 (例えば境界条件依存性) を持った, 次の評価式を得る [5].

$$\mathcal{H}(G) \sim \left(\frac{q}{e}\right)^N \sqrt{\frac{\pi}{N}} \left|\frac{\det'^{\frac{1}{2}}(A^T\Delta)}{\det^{\frac{1}{2}}(A^L\Delta)}\right|, \quad A^{\mathrm{L,T}}_{rr'} \sim i(\Delta^{-1})_{rr'} \pm \frac{i}{q}\delta_{rr'}. \qquad (N\to\infty) \tag{4}$$

これを, $L_1 \times L_2$ の周期的境界条件, および skew-周期的境界条件を課した 2 次元単純正方格子に適用した結果が図 1 である. 因子 $(q/e)^N$ を除いて L_2/L_1 の関数になっていることがわかる.

*hig@rice.c.u-tokyo.ac.jp

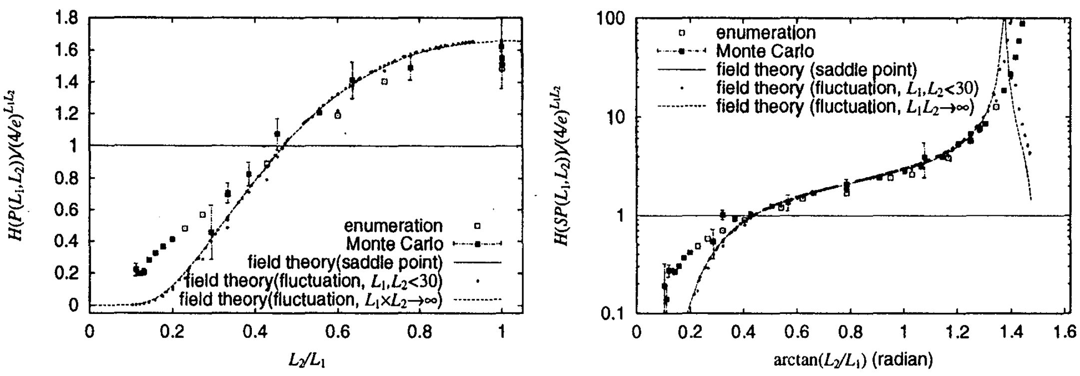

図 1: (左) 周期的境界条件を課した $L_1\times L_2$ 正方格子の $\mathcal{H}(G)$. $(q/e)^N$ で規格化. 場の理論の予言 (点) と計算機による数え上げ (白黒の四角). (右) L_2 を横切る境界条件を skew にした場合.

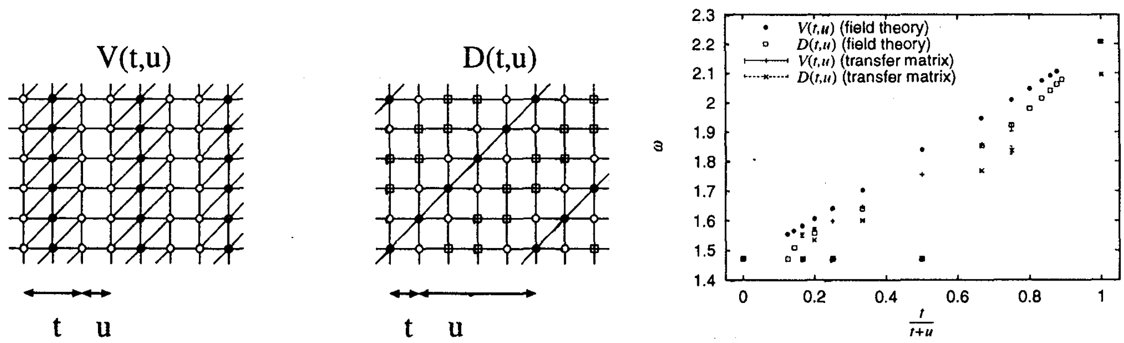

図 2: (左) 正方格子に対角の辺を加えた格子. (右) $t=1$ または $u=1$ の場合の ω の値.

非一様な格子への適用

式 (1) は, 格子が一様である場合にしか使えない. 2 次元の square-triangular 型の格子 (図 2(左)) は一様でない格子の例である. 非一様な格子の場合に, 鞍点を見つけ, $\mathcal{H}(G)$ を評価した [6]. 結果は, 式 (1) で ω の値が修正されたものだった. 図 2(左) の格子について, ω の値を, 場の理論の予言, 状態和模型に書き直し転送行列を数値対角化して求めた結果を図 2(右) に示す.

参考文献

[1] J. Bascle, T. Garel, and H. Orland, *J. Phys. A Math. Gen.* **25** (1992) L1323.

[2] S. Doniach, T. Garel, and H. Orland, *J. Chem. Phys.* **105** (1996) 1601.

[3] M. T. Batchelor, H. W. J. Blöte, B. Nienhuis, and C. M. Yung, *J. Phys. A Math. Gen.* **29** (1996) L399.

[4] H. Orland, C. Itzykson, and C. de Dominicis, *J. Physique* **46** (1985) L353.

[5] S. Higuchi, *Phys. Rev.* **E58** (1998) 128, cond-mat/9711152.

[6] S. Higuchi, *'Compact polymers on decorated square lattices,'* In preparation.